



TITLE:

量子系のモンテカルロ法(基研短期  
研究会『統計物理の現状と展望』  
～STATPHYS19に向けて～,研究会  
報告)

AUTHOR(S):

羽田野, 直道

---

CITATION:

羽田野, 直道. 量子系のモンテカルロ法(基研短期研究会『統計物理の現状と展望』～STATPHYS19に向けて～,研究会報告). 物性研究 1992, 58(5): 527-534

ISSUE DATE:

1992-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94922>

RIGHT:

## 量子系のモンテカルロ法

東大理 羽田野 直道

## 1 初めに

高温超伝導体と関係して 2 次元の量子現象が注目を集めているが、できるだけ大きな有限系をモンテカルロ計算して定量的に議論しようとする研究が増えてきている。ここでは量子系のモンテカルロ法の現状を、その方法論に焦点を当てつつ述べることにする。

本題に入る前にモンテカルロ法、特に重みつきサンプリングについて復習しておく。多自由度系の計算には広大な状態空間にわたる足し算がつきものである。これを部分的な和で済ませようとするのがモンテカルロ法である。ところで統計力学計算では足し算の際にボルツマン分布関数がかかってくる。低温では分布関数は状態空間中のごく一部にしか値を持たない。したがって全状態空間をただ漫然とサンプリングしていたのでは、物理量の評価に効いてくる「有効サンプル数」が非常に少なくなってしまう。このような無駄をしないためには重要な状態ほど何度もサンプリングするようなアルゴリズムを考えなければならない。これが重みつきサンプリングである。Metropolis らは状態空間の中のマルコフ過程を構成することでそれを実現した。状態 A から状態 B への遷移確率を 2 つの状態のボルツマン重みの比から計算し、それを乱数と比較して遷移 A→B の可否を決定する。遷移確率がある条件を満たしていれば、十分長い時間の後には各状態が重みに比例する確率で出現する。

重みつきサンプリングの方法が適用できるためには、問題が次のような条件を兼ね備えていなければならない。第 1 に 2 つの状態の重みの比が計算が容易でなくてはならず、第 2 に重みが確率の意味をもっているため負であってはならない。

## 2 有限温度の量子系に対するアルゴリズム

## 2.1 鈴木-Trotter 変換と World-Line 法

単純に考えれば、量子系でも各状態をその重み  $w(\psi) = \langle \psi | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \psi \rangle$  に比例して出現させればよいことになる。しかしこの密度行列を求めるにはハミルトニアン  $\mathcal{H}$  を対角化しなければならない。小さな系でなければ不可能である。そこで重みを計算しやすい形に変形しなければならない。

よく行なわれるのは、全ハミルトニアンを部分クラスター  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \dots$  に分けて鈴木-Trotter 分解 [1,2]

$$\exp(-\beta \mathcal{H}) = [\exp(-\beta \mathcal{H}_1/n) \exp(-\beta \mathcal{H}_2/n)]^n + O(\beta^2/n) \quad (1)$$

を適用し、「トロッター数」無限大  $n \rightarrow \infty$  の極限への外挿から正しい値を得る方法である。なお、より高い次数の補正項しか持たない近似子を漸化的に構成する「フラクタル分解」が鈴木によって提案されている [3,4]。

式 (1) を使うと分配関数  $Z \equiv \sum_{\psi_1} \langle \psi_1 | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \psi_1 \rangle$  を [5-8]

$$Z \simeq \sum_{\{\psi\}} \langle \psi_1 | e^{-\beta \mathcal{H}_1/n} | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | e^{-\beta \mathcal{H}_2/n} | \psi_3 \rangle \dots \langle \psi_{2n} | e^{-\beta \mathcal{H}_2/n} | \psi_1 \rangle \equiv \sum_{\{\psi\}} w\{\psi\} \quad (2)$$

と変形できる。ここでは鈴木-Trotter 分解によって発生した幾つもの指数関数演算子の間に、完全系による「1 の分解」 $\sum_{\psi_i} |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$  をはさみこんでいる。したがって右辺の和記号は拡大された状態空間  $\{\psi\} \equiv \{\{\psi_1\}, \{\psi_2\}, \dots, \{\psi_{2n}\}\}$  にわたる和を表している。この和をサンプリングするのが World-Line 法の考え方である。例えば粒子系を考えよう。完全系  $\{\psi_i\}$  としては、粒子の場所を指

定する基底をとると便利である。量子系では演算子  $\exp(-\beta\mathcal{H})$  によって粒子が虚時間方向に時間発展していくのだが、式 (2) の変形は虚時間  $0 \rightarrow \beta$  を  $n$  個の時間層に区切り、粒子の移動の途中経過 (世界線)  $\psi_1 \rightarrow \psi_2 \rightarrow \psi_3 \dots$  を追うことに相当している。あるモンテカルロ・ステップである世界線を得たとすると、次に途中経過を一部変えたような世界線を新たに作り、2 つの世界線の重み  $w\{\psi\}$  の比を計算する。これは容易に計算できるので、状態空間  $\{\psi\}$  の中の確率過程が構成できることになる。このように World-Line 法は経路積分の重みつきサンプリングであることがわかる。

この方法によれば、系全体 (格子点数  $N$ , トロッター数  $n$ ) の状態  $\{\psi\}$  を一通り更新するのに  $Nn$  に比例する計算時間がかかる。これは以下で述べる他の方法と比べると制約が緩く、系のサイズを大きくするのが比較的容易なのがこの方法の特徴である。

## 2.2 負符号問題

上で説明したアルゴリズムでも、模型によって問題が起こる。フェルミオン系やフラストレートしたスピン系では、式 (2) で定義したボルツマン重み  $w\{\psi\}$  が負になる状態が存在する。このままでは 1 節で示した第 2 条件に抵触して重みつきサンプリングができない。通常は重みをその絶対値で置き換えたような「絶対値系」 $Z' \equiv \sum |w\{\psi\}|$  を新たに定義して、そのボルツマン重み  $w' \equiv |w|$  を基にシミュレートする。元の系  $Z = \sum w$  の情報はシミュレーションの過程で「符号」

$$S \equiv \frac{Z}{Z'} = \frac{\sum |w| \cdot \text{sign}(w)}{\sum |w|} \quad (3)$$

を測定しておくことによって得られる。問題は低温で「符号」が小さくなり、統計誤差に埋もれて測定不可能になってしまうことがある。これを負符号問題と呼ぶ。

この問題は以下のように解釈できると思われる [9,10]。量子系の状態空間を考えよう (図 1)。低

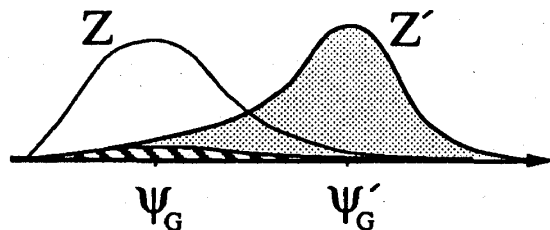


図 1: 量子系の状態空間中のボルツマン分布関数。知りたい系  $Z$  と「絶対値系」 $Z'$  では分布域が違ふ。「絶対値系」のシミュレーションで元の系のボルツマン分布 (斜線部) を得るためには、余分に勘定してしまった状態 (点網部) をキャンセルさせなければならない。したがって元の系のボルツマン分布を再現する「有効サンプル数」は僅かになる。

温ではボルツマン分布関数は知りたい系  $Z$  の基底状態  $\psi_G$  付近にのみ値を持っている。重みつきサンプリングの精神に従えばこの基底状態付近を重点的にサンプリングしたい。しかし技術的困難のためにそれができないので、別の系  $Z'$  の基底状態  $\psi'_G$  付近をサンプリングしてしまうことになる。知りたい系のボルツマン分布を再現するためには、余分に勘定してしまった状態を互いにキャンセルさせて切り捨てなければいけない。それが「符号」(3) を測定することの意味である。「符号」の値が  $1/1000$  であれば、1000 個の状態をサンプルしてきてもそのうち 999 状態までは無駄なサンプルで、「有効サンプル数」はわずかに 1 である、ということを意味している。これが統計誤差の増大をもたらす。低温になるほど 2 つのボルツマン分布の重なりは指数関数的に小さくなり、状況は急激に悪化する。

負符号問題は未解決の難問である。何らかの方法で 2 つの系の基底状態を近付けて「有効サンプル数」を増やすようなアルゴリズムが求められる [10]。

## 2.3 Auxiliary-Field 法

ハイゼンベルク反強磁性体は、ハーフ・フィロド・ハバード模型のクーロン力が強い極限と考えられる。正方格子上的反強磁性体では World-Line 法でも負符号問題が現れない。ところがハーフ・フィロド・ハバード模型を World-Line 法で扱うと負符号問題が現れてしまう。この系で負符号問題が現れないようなアルゴリズムとして開発されたのが Auxiliary-Field 法 [11-14] である。

ハバード模型ハミルトニアンを運動エネルギー  $K \equiv -t \sum c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$  とクーロン斥力  $V \equiv U \sum n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$  に鈴木-Trotter 分解する。更に各格子点上のクーロン斥力項に Stratonovich-Hubbard 変換 [11]

$$e^{-xU n_{\uparrow} n_{\downarrow}} = \frac{1}{2} \sum_{s=\pm 1} e^{-x\tilde{V}} \quad ; \quad -x\tilde{V} \equiv as(n_{\uparrow} - n_{\downarrow}) - xU(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})/2, \quad \cosh a = e^{xU/2} \quad (4)$$

をほどこす。ここで新たにイジング変数  $s$  が導入されている。変換後のポテンシャル項  $\tilde{V}$  ではフェルミオン間には一見相互作用がなくなった形になり、対角和が計算できる。以上から分配関数は、

$$\text{Tr } e^{-\beta\mathcal{H}} \simeq \text{Tr} \left[ e^{-\beta K/n} e^{-\beta V/n} \right]^n = 2^{-Nn} \sum_{\{s\}} \text{Tr} \left[ e^{-\beta K/n} e^{-\beta \tilde{V}\{s\}/n} \right]^n \equiv \sum_{\{s\}} w\{s\} \quad (5)$$

と書けた。ここで多くのイジング変数  $\{s\}$  に関する和が残ったので、それをモンテカルロ和で代用するのが Auxiliary-Field 法である。

この方法は期待通り正方格子上的ハーフ・フィロド・ハバード模型について負符号問題を起こさない。またハーフ・フィロド以外の場合でもフェルミオンの反可換性のある程度考慮に入れているので、World-Line 法よりも負符号問題が緩和されることが経験的に知られている。2次元フェルミオン系の研究はほとんどこの方法によって行なわれている。一方この方法が World-Line 法に比べて劣る点は、式 (5) の最右辺でイジング変数が長距離相互作用をしていることにある。このため重みの比の計算にかかる時間が、World-Line 法の場合は  $Nn$  に比例するのに対し、Auxiliary-Field 法では  $N^3n$  に比例して増加する。したがって系のサイズをなかなか大きくできないのが問題とされている。

## 2.4 Decoupled-Cell 法

量子系のボルツマン重み  $w(\psi)$  を鈴木-Trotter 変換せずに、次のように近似する方法もある。

スピン系を例にとろう。ある場所のスピンを更新するステップ  $|\uparrow, \bar{\psi}\rangle \rightarrow |\downarrow, \bar{\psi}\rangle$  において、ハミルトニアンを問題のスピンを含むセルのハミルトニアン  $\mathcal{H}_{\text{cell}}$  とそれ以外の部分  $\bar{\mathcal{H}}_{\text{cell}}$  に分けて、密度演算子を  $\exp(-\beta\mathcal{H}) \simeq \exp(-\beta\mathcal{H}_{\text{cell}}) \exp(-\beta\bar{\mathcal{H}}_{\text{cell}})$  と近似する。すると2つの状態の重みの比は

$$\frac{w(\downarrow)}{w(\uparrow)} \simeq \frac{\langle \downarrow, \bar{\psi} | \exp(-\beta\mathcal{H}_{\text{cell}}) | \downarrow, \bar{\psi} \rangle}{\langle \uparrow, \bar{\psi} | \exp(-\beta\mathcal{H}_{\text{cell}}) | \uparrow, \bar{\psi} \rangle} \quad (6)$$

と近似されるので、部分ハミルトニアン  $\mathcal{H}_{\text{cell}}$  を対角化すればよい。これを Decoupled-Cell 法と呼ぶ [15-17]。高温では温度揺らぎのために量子コヒーレンスが強く働かず、遠方の相互作用を無視しても系統的誤差は小さいと思われる。系統的誤差は低温では拡大していく。

この方法の特徴は、状態空間が増えていないことと、密度行列の対角要素のみをとっているために負符号問題が現れないことである。したがって、統計誤差は非常に抑制することができる。一方、課題は系統的誤差の評価であろう。扱うセルの大きさを大きくすることによって系統的誤差は改善されると期待される [16] が、鈴木-Trotter 変換の場合と違ってその依存性は定量的にはわかっていないので、外挿法が明らかではない。また、セルの中は厳密に対角化しておかねばならないので、扱えるセルの大きさには限界がある。

## 2.5 Handscomb の方法

以上の方法とは全く発想を変えて、高温展開の和をモンテカルロ・サンプリングするのが Handscomb の方法である [18-21]。すなわち、

$$\text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} \left( \sum_i \mathcal{H}_i \right)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\{i,j,\dots\}} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} (\mathcal{H}_i \mathcal{H}_j \dots) \quad (7)$$

と展開する。なお最右辺ではボンドに関する展開をしている。最右辺の対角和は古典系のように格子上のリング・ダイアグラムと対応させることができ、等方的なハイゼンベルク模型の場合にはその重みは容易に計算できるので、展開次数  $n$  とボンドの組み合わせ  $\{i,j,\dots\}$  の和を重みつきサンプリングで代用する。リング・ダイアグラムは粒子の世界線と同じ意味を持っている。

この方法は系統的誤差が現れないことを特徴としている。しかし三角格子上の反強磁性ハイゼンベルクでは負符号問題が現れる。また異方的ハイゼンベルク模型などではダイアグラムの重みを計算するのが大変になるため、今のところ応用は限られている。

## 3 量子系の基底状態に対するアルゴリズム

### 3.1 Auxiliary-Field 法

基底状態に関するモンテカルロ・アルゴリズムは、現在のところ有限温度からの外挿あるいは射影

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \exp(-\beta \mathcal{H}) |\psi_T\rangle = |\psi_G\rangle \quad (8)$$

に頼っている。ここで  $|\psi_T\rangle$  は基底状態  $|\psi_G\rangle$  と直交しない試行関数である。基底状態物理量  $Q_G$  は

$$Q_G = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\langle \psi_T | Q \exp(-\beta \mathcal{H}) | \psi_T \rangle}{\langle \psi_T | \exp(-\beta \mathcal{H}) | \psi_T \rangle} \quad (9)$$

となるが、この指数関数演算子の部分を鈴木-Trotter 分解すれば有限温度の場合と同じようにモンテカルロ計算できる。フェルミオン系では負符号問題が深刻化するので、主に Auxiliary-Field 法が用いられている [22-25]。なお、有限温度の計算との違いは試行関数に関する和をとらない点である。試行関数の選び方によっては、負符号問題が深刻化する前に基底状態に近付くこともある [26]。

### 3.2 負符号問題の温度依存性と Correction-Ratio 法

最近になって Auxiliary-Field 法において、「符号」が低温で小さくなる性質を逆に利用して基底状態の物理量を測定する研究がいくつかなされている [13,27-30]。

式 (3) で定義される「符号」（基底状態のアルゴリズムの場合には多少定義が異なる）は低温で

$$S \simeq S_0 \frac{\exp(-\beta E_G)}{\exp(-\beta E'_G)} = S_0 \exp(-\beta \Delta) ; \quad \Delta \equiv E_G - E'_G \quad (10)$$

という振舞をする。ここで  $E_G$  と  $E'_G$  はそれぞれ  $Z$  と  $Z'$  の基底エネルギーである。そこで図 2 のようなプロットをすれば傾き  $\Delta$  が評価できる。一方  $Z'$  では負符号問題が現れないから、その基底エネルギー  $E'_G$  は精度よく評価できる。以上から元の系  $Z$  の基底エネルギーが  $E_G = E'_G + \Delta$  と求められる [27-29]。一般の物理量  $Q_G$  に関しても、Ratio Correction と呼ばれる量の期待される振舞

$$R \equiv \sum w Q / \sum |w| Q \simeq Q_0 \exp(-\beta \Delta) \quad (11)$$

を利用して (図 2),  $Z'$  の基底状態物理量  $Q'_G$  から  $Q_G = Q'_G \times Q_0 / S_0$  と求められる [30]。

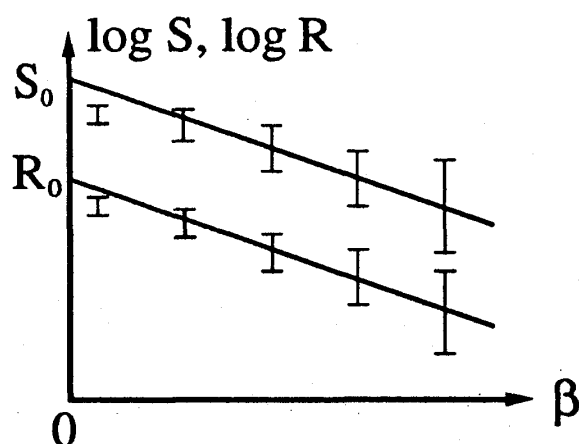


図 2: 「符号」 $S$  と「補正比」 $R$  の温度依存性. 比較的高温のデータを使い, また幾つもの点でフィットすることから, 各データ点の統計誤差にもかかわらず傾きと切片は比較的精度よく得られると期待される.

### 3.3 Green's-Function モンテカルロと Projector モンテカルロ

ここで説明する 2 つの方法は世界線の経路積分という意味では World-Line 法と同じであるが, サンプルングの方法が違っている. 基底状態を求める原理はやはり式 (8) を使う. 射影演算子の近似  $\exp(-\beta\mathcal{H}) \simeq [G(\beta/n)]^n$  として  $G(x) \equiv 1 - x\mathcal{H}$  を使う方法を Green's-Function モンテカルロ [14,31-33], 鈴木-Trotter 変換の形  $G(x) \equiv \exp(-x\mathcal{H}_1)\exp(-x\mathcal{H}_2)$  を使う方法を Projector モンテカルロ [34] と呼ぶ.

試行関数としてある場所に粒子がいる状態をとるとする. グリーン関数  $G(\beta/n)$  を 1 回作用させると, 粒子がそのまま同じ位置にいる状態, 右へ移動した状態, 左へ移動した状態の重ね合わせが発生する. そこでそれぞれの重ね合わせの係数を計算し, それに比例する確率でどれか一つを選ぶ. その状態に再びグリーン関数を作用させ, 同じ操作を繰り返す. こうして虚時間方向へのランダム・ウォークが構成できた. 上の手順を何度も繰り返せば基底状態分布の 1 サンプルを得る. 以上を 1 モンテカルロ・ステップとして再び最初に戻り, 新たにランダム・ウォークを始める.

各サンプルが互いに独立である点が World-Line 法との違いである. World-Line 法では各モンテカルロ・ステップで, 1 つ前の世界線サンプルを少しだけ変形した世界線しか得られない. しかしここで述べた方法を使えば, 次のサンプルは前のサンプルと全く無関係に発生する. World-Line 法で Trotter 数を大きくすると, 世界線が動きにくくなり統計性が悪くなることがあるが, そのような場合に Green's-Function モンテカルロや Projector モンテカルロが有効と考えられる. なおこの方法は Thermofield モンテカルロ [35] として有限温度に拡張されている.

一方で次節で見るように, フェルミオン系ではやはり負符号問題から逃れられない. しかもこの方法では, グリーン関数を 1 つずつ演算していくという性格上, 長距離相互作用が現れる Auxiliary-Field 法が簡単には応用できない. したがって負符号問題はかなり深刻になることが予想される.

### 3.4 Green's-Function モンテカルロにおける負符号問題と Fixed-Node 近似

Green's-Function モンテカルロでの負符号問題を, 自由な 2 個のフェルミオンを例に考えてみよう. 求めたい波動関数は  $\psi = \phi(\vec{r}_1)\phi(\vec{r}_2) - \phi(\vec{r}_2)\phi(\vec{r}_1)$  のように反対称になっていて, 状態空間  $(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  の中で  $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$  に節 (Node) がある. この形を得るために 2 つのフェルミオンを適当に配した試行関数  $\psi_T$  から出発する Green's-Function モンテカルロを実行したとする. 状態  $(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$  が状態空間中をランダム・ウォークしてゆく途中で, 節を越える際に波動関数の符号が反転するので, そのようなウォークに対する重みは負になってしまう.

このような負符号問題を避けるために Fixed-Node 近似が提案されている [33,36-39]. 節の位置が

わかっている場合、状態空間を節（一般には超面）で区切って、各部分空間で別々にランダム・ウォークさせる。節を越えるようなウォークは禁止するのである。最後につなが合わせて答えが得られる。もちろん相互作用している多体系では一般には節の位置を予め知るのは難しいので、物理的考察から近似的に設定するしかない。その場合の系統的な誤差の評価が今後の課題と言える。

#### 4 ダイナミクスに関する物理量への解析接続と Maximum-Entropy 法

実時間に関する物理量を直接求めるアルゴリズムは現在に至っても開発されていない。これらの情報は虚時間に関する物理量、温度グリーン関数  $G(\tau)$  から解析接続によって求められる。あるいは、

$$G(\tau) = \int_0^\beta d\omega A(\omega) \frac{\exp(-\omega\tau)}{1 + \exp(-\omega\beta)} \quad (12)$$

の逆変換と考えてもよい。得られたデータ  $\{G_{\text{data}}(\tau_j)\}$  を再現するスペクトル  $\{A_i\} \equiv \{A(\omega_i)\}$  をいかに求めるか、という問題である。単純には最小自乗法、すなわち

$$\chi^2 \equiv \sum_j \frac{[G_{\text{data}}(\tau_j) - G_{\text{fit}}(\tau_j)]^2}{\sigma_j^2} ; \quad G_{\text{fit}}(\tau) \equiv \sum_i \Delta\omega A_i \frac{\exp(-\omega_i\tau)}{1 + \exp(-\omega_i\beta)} \quad (13)$$

を最小にするように  $\{A_i\}$  を決める方法が考えられる。しかし一般にはこの方法はうまくいかない。スペクトル関数については、データ以外に予め総和則  $\int d\omega A(\omega) = 1$  や正値性  $A(\omega) \geq 0$  などがわかっていることがあるが、最小自乗法で得られる答えはこれらの性質を満たさないことが多いのである。これでは物理的な解答とは言えない。総和則などを解析接続の手順の上でどのように活かすかが問題になる。

最近 Gubernatis らのグループが、画像処理などのデータ解析に用いられる Maximum-Entropy 法をこの問題に応用している [40-42]。例えば CT スキャンを考えよう。ある物体に様々な角度から放射線を照射して透過率  $\{T(\theta_i, \phi_i)\}$  を測定する。得られたデータを変換して物体内部の密度分布  $\rho(\vec{r})$  を評価したい。ただし物体の全質量  $M = \int \rho(\vec{r}) d\vec{r}$  は別途に精密測定できるので、その情報を利用したい。このような場合に Maximum-Entropy 法が用いられている。

Maximum-Entropy 法は条件つき確率の定理 (Bayes の定理) を出発点とする。すなわち、温度グリーン関数 (data) とそれに対応するスペクトル関数 (image) の尤もらしさ  $P[\text{data}, \text{image}]$  は

$$P[\text{data}, \text{image}] = P[\text{data}|\text{image}] \times P[\text{image}] = P[\text{image}|\text{data}] \times P[\text{data}] \quad (14)$$

と書き直せる。ここで  $P[\text{image}|\text{data}]$  はグリーン関数のデータを与えられた時のスペクトル関数の尤もらしさである。解析接続は、手持ちのデータから  $P[\text{image}|\text{data}]$  を最大にするスペクトルを引き出す問題と言い換えることができる。そのためには、スペクトル関数を与えられた時のデータの尤もらしさ  $P[\text{data}|\text{image}]$  と、スペクトル関数そのものの尤もらしさ  $P[\text{image}]$  との積を最大にする。前者は手持ちのデータと推定スペクトル関数の整合性を意味しており、式 (13) の自乗和  $\chi^2$  を使って  $P[\text{data}|\text{image}] \propto \exp(-\chi^2)$  と定義できる。一方  $P[\text{image}]$  は、推定されるスペクトル関数が総和則などの観点から見てどの程度尤もらしいかを意味しており、これはシャノン・エントロピーを用いて

$$P[\text{image}] \propto \exp(\alpha S) \equiv \exp\left(\alpha \sum_i \Delta\omega [A_i - m_i - A_i \log(A_i/m_i)]\right) \quad (15)$$

と定義する。ここで  $\alpha$  は調節可能なパラメータ、 $\{m_i\} \equiv \{m(\omega_i)\}$  は総和則などを正しく満たしている「モデル」スペクトルである。以上の定義でよいとすれば、式 (14) より

$$P[\text{image}|\text{data}] \propto \exp(-\chi^2 + \alpha S) \quad (16)$$

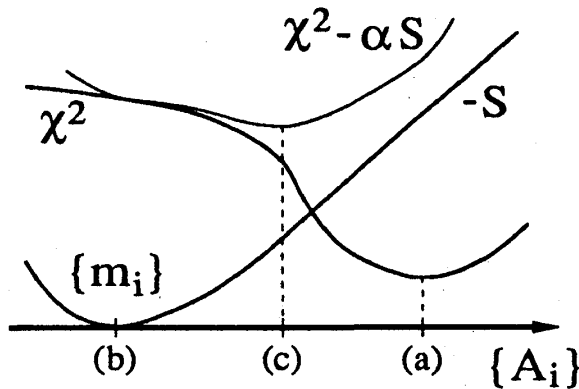


図 3: 自乗和  $\chi^2$  とエントロピー  $S$  の推定値  $\{A_i\}$  依存性. (a) 最小自乗法による答え. (b) 総和則を満足する「モデル」 $\{m_i\}$ . (c) Maximum-Entropy 法による答え. 総和則とよりコンシステントになっている.

となり、右辺の指数を最大にするスペクトル  $\{A_i\}$  が最良の答えとなる (図 3). 「モデル」の設定には任意性があり (パラメター  $\alpha$  についてはある程度は最適化できる), 誤差の評価は単純ではないが, その他の解析接続の方法よりはよい結果を与えるようである [40-42].

## 5 今後の課題

以上, 量子系に対するモンテカルロ法の現状を簡単に述べてきた. 最後に, 今後解決が望まれる方法論上の課題を, 私なりにリストアップしてみよう.

まず部分的にせよ解決が急がれるのは負符号問題である. 上でみたように, これまでは重みつきサンプリングの観点からは適正と言えないアルゴリズムでシミュレートされてきた. 実際にシミュレートする系の基底状態と求めたい系の基底状態を近付ける, というのが改善の指針となるだろう.

次に, 基底状態に対するアルゴリズムはこれまで有限温度からの外挿に頼ってきた. しかし特に負符号問題の発生する系では温度が低くなるにつれて求めたい系の情報が急速に失われるので, 有限温度からの外挿は本質的困難を抱えていると言える. 理想的には最初から  $T = 0$  に限ってシミュレートされるべきである. そのようなアルゴリズムを開発できないものだろうか.

ダイナミクスに関する物理量については, もちろんより有効な解析接続の方法の探索がなされるべきである. 本来は量子揺らぎであるものを熱揺らぎに置き換えて計算するのではなく, 直接的に実時間情報を引き出すアルゴリズムはつくれないものだろうか.

今日コンピュータの性能は飛躍的に増大しつつあり, 古典系, 特にスピングラス系の研究でモンテカルロ法は既に中心的な役割を果たすに至っている. その過程では様々な方法論的困難が, 新たな物理的概念の発見と共に乗り越えられてきた. しかし量子系においては, まだ方法論上の問題点が十分乗り越えられたようには見えない. これから大いに研究の余地が残された分野である.

## 参考文献

- [1] M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **56**, 1454-1469 (1976)
- [2] M. Suzuki, J. Math. Phys. **26**, 601-612 (1985)
- [3] M. Suzuki, J. Math. Phys. **32**, 400-407 (1991)
- [4] N. Hatano and M. Suzuki, Prog. Theor. Phys. **85**, 481-491 (1991)
- [5] M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, Prog. Theor. Phys. **58**, 1377-1387 (1977)
- [6] J. E. Hirsch, R. L. Sugar, D. J. Scalapino, R. Blankenbecler, Phys. Rev. B **26**, 5033-5055 (1982)
- [7] レビュー: M. Suzuki, J. Stat. Phys. **43**, 883-909 (1986)



- [8] レビュー: 宮下 精二, 固体物理 **23**, 231-238 (1988); **23**, 315-321 (1988); **24**, 81-93 (1989)
- [9] I. Morgenstern, Z. Phys. B**77**, 267-273 (1989)
- [10] N. Hatano and M. Suzuki, "Representation Basis in Quantum Monte Carlo and Negative-Sign Problem", submitted to Phys. Lett. A
- [11] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B**31**, 4403-4419 (1985)
- [12] レビュー: 宮下 精二, 今田 正俊, 固体物理 **24**, 746-754 (1989)
- [13] レビュー: 羽田野 直道, 物性研究 **56**, 459-493 (1991)
- [14] レビュー: H. De Raedt and W. von der Linden, to appear in *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*, ed. K. Binder, (Springer-Verlag)
- [15] S. Homma, H. Matsuda and N. Ogita, Prog. Theor. Phys. **75**, 1058-1065 (1986)
- [16] H. Matsuda, K. Ishii, S. Homma and N. Ogita, Prog. Theor. Phys. **80**, 583-587 (1988)
- [17] T. Horiki, S. Homma, H. Matsuda and N. Ogita, Prog. Theor. Phys. **82**, 507-513 (1989)
- [18] D. C. Handscomb, Proc. Camb. Philos. Soc. **58**, 594-598 (1962)
- [19] D. C. Handscomb, Proc. Camb. Philos. Soc. **60**, 115-122 (1964)
- [20] D. H. Lee, J. D. Joannopoulos and J. W. Negele, Phys. Rev. B**30**, 1599-1602 (1984)
- [21] Y. C. Chen, H. H. Chen and Felix Lee, Phys. Rev. B**43**, 11082-11087 (1991)
- [22] G. Sugiyama and S. E. Koonin, Ann. Phys. **168**, 1-26 (1986)
- [23] S. Sorella, S. Baroni, R. Car and M. Parrinello, Europhys. Lett. **8**, 663-668 (1989)
- [24] S. R. White, D. J. Scalapino, R. L. Sugar, E. Y. Loh, J. E. Gubernatis and R. T. Scalettar, Phys. Rev. B**40**, 506-516 (1989)
- [25] M. Imada and Y. Hatsugai, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 3752-3780 (1989)
- [26] N. Furukawa and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 3669-3674 (1991)
- [27] E. Y. Loh Jr., J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, S. R. White, D. J. Scalapino and R. L. Sugar, Phys. Rev. B**41**, 9301-9307 (1990)
- [28] D. R. Hamann and S. B. Fahy, Phys. Rev. B**41**, 11352-11363 (1990)
- [29] S. Sorella, Int. J. Mod. Phys. B**5**, 937-976 (1991)
- [30] N. Furukawa and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **60**, 810-824 (1991)
- [31] M. H. Kalos, D. Levesque and L. Verlet, Phys. Rev. A**9**, 2178-2195 (1974)
- [32] S. A. Vitiello and P. A. Whitlock, Phys. Rev. B**44**, 7373-7377 (1991)
- [33] レビュー: K. E. Schmidt and M. H. Kalos, in *Application of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, 2nd edition, ed. K. Binder, (Springer-Verlag, Berlin, 1987)
- [34] R. Blankenbecler and R. L. Sugar, Phys. Rev. D**27**, 1304-1311 (1983)
- [35] M. Suzuki, S. Miyashita and M. Takasu, Phys. Rev. B**35**, 3569-3575 (1987)
- [36] D. M. Ceperly and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566-569 (1980)
- [37] G. An and J. M. J. van Leeuwen, Phys. Rev. B**44**, 9410-9417 (1991)
- [38] レビュー: M. H. Kalos, in *Monte Carlo Methods in Quantum Problems*, ed. M. H. Kalos, (D. Reidel Publishing Company, Holland, 1984)
- [39] S. Fahy and D. R. Hamann, Phys. Rev. B**43**, 765-779 (1991)
- [40] R. N. Silver, D. S. Sivia and J. E. Gubernatis, Phys. Rev. B**41**, 2380-2389 (1990)
- [41] J. E. Gubernatis, M. Jarrell, R. N. Silver and D. S. Sivia, Phys. Rev. B**44**, 6011-6029 (1991)
- [42] M. Jarrell, J. E. Gubernatis and R. N. Silver, Phys. Rev. B**44**, 5347-5350 (1991)